양자 임계 현상과 수치 재규격화군

글_이현정·고등과학원 물리학부 연구원

연료전지, LED 등의 원료로서 높은 부가가치를 갖는 희토류 금속 화합물에 대한 산업계의 관심이 높아진 가운데, 이 화합물질이 보이는 초전도, 강유전, 강자성 등의 다양한 현상에 대한 연구가 활발히 이루어지고 있다. 알루미늄 같은 통상적인 금속에서는 쉽게 보이지 않는 이러한 복잡한 현상에 내재된 원리는 무엇이며, 이를 규명하기 위한 이론적 접근법은 무엇인지 본문을 통해 간단히 소개하려고 한다.

1. 페르미 액체 이론 (Fermi liquid theory)

알루미늄처럼 전기전도도가 높은 금속의 기저상태(ground state)는 전자의 평균차지수(occupation number)와 페르미면(Fermi surface)에 의해 단일하게 주어지며, 이런 단일한 기저상태 밖으로 들뜬 전자의 특성은 페르미 액체 이론 안에서 잘 설명된다. 페르미 액체 이론의 핵심은 준입자 가중치(quasiparticle-weight, 이하 Z)로서 상호작용에 의해 결정되는 전자의 유효질량(m^*)과 단일 전자질량(m)의 비율을 나타낸다($Z=m/m^*$). 페르미 액체가 따르는 물리적 법칙은 상호작용이 전혀 없는 페르미 이상 기체(ideal Fermi gas)의 경우와 정성적으로 동일하며 오직 Z에 따른 정량적인 차이만을 가지므로, 페르미 액체로 간주되는 금속의 성질은 이론적인 이해에 어려움이 없다.

2. 양자 상전이 (Quantum phase transition)

중첩된(degenerate) 기저상태를 갖는 시스템에 대해서는 위에 언급된 페르미 액체 이론이 적용될 수 없다. 예를 들어, 우라늄이나 희토류 금속을 기반으로 한 무거운 페르미온계 물질에 1GPa 정도의 압력을 가하면 물질이 반강자성에서 초전도로 변하는 양자 상전이가 일어나는데, 이 지점에서 시스템은 둘 중 어느 것이 더 낮은 에너지를 갖는지 구분하기 어려운 중첩 상태에 놓이게 된다.

특히 상전이의 차수가 2차인 경우, 기저상태에 놓인 전자의 차지수 분포는 반강자성이나 초전도 상태의 차지수 분포가 아닌 미지의 형태를 띠게 되며, 이러한 상태를 양자 임계점(Quantum critical point)이라고 부른다. 양자 임계점에 놓인 시스템의 기저상태, 준입자는 모두 페르미 액체 이론으로 설명할 수 없는 특성을 보이는데 w/T-스케일링이 그 대표적인 예이다. w/T-스케일링

이란, 열역학/전기/자기적 함수가 온도(k_bT)를 제외한 어떤 에너지 스케일과도 무관해지는, 즉 시간 차원에서의 스케일 불변성을 갖게 되는 현상을 의미한다. 전자 간의 상호작용이 활발한 시스템에서 상호작용을 관장하는 특정 에너지 스케일이 관측되지 않는다는 것은 상당히 이례적인 일로, 상호작용 에너지와 온도 감소로 인한 엔트로피 변화량이 정확히 비례관계를 갖고 있어야만 일어날 수 있는 상황이다.

3. 재규격화군 (Renormalization Group, 이하 RG)

온도 감소로 인한 엔트로피 변화를 한계운동량(momentum cut–off)이라는 개념을 도입해 통제하면서 그에 따른 전자 상호작용 에너지의 추이를 계산하는 방식을 재규격화군(RG)이라 한다. 구체적으로 말해, 분배함수(partition function)의 적분구간을 줄여가는 단계를 반복하면서, 저온에서 스케일 불변한(scale invariant) 상호작용의 양상, 즉 고정점(fixed point)을 알아내는 계산법이다.

그러나 한계운동량을 줄이는 단계를 거듭할수록 계산해야 하는 피적분항의 개수가 기하급수적으로 늘어나기 때문에 수학적 방법만으로 정확한 해를 구하기 어렵다. 섭동(perturbation) 원리를 적용, 피적분항의 개수를 줄이는 섭동 RG 이론(epsilon expansion)이 있으나, 이는 시스템의 차원이 상임계차원(upper critical dimension)에 가까워서 양자요동(quantum fluctuation)이 두드러지지 않을 때에만 사용할 수 있다.

4. 수치재규격화군 (Numerical Renormalization Group, 이하 NRG)

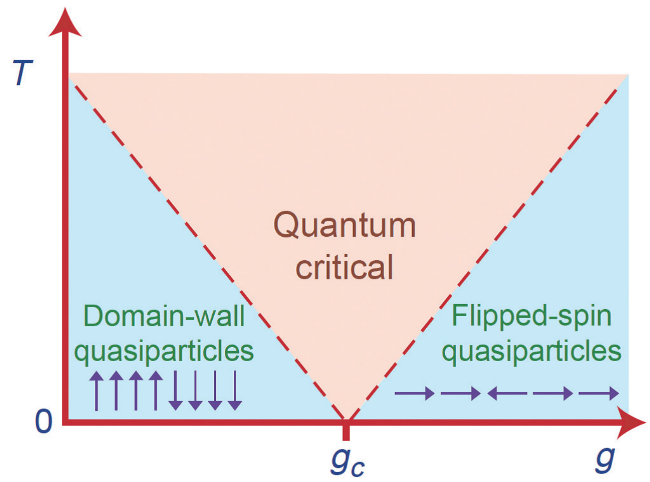
Mott 도체–부도체 전이현상 같이 실제 자연계에서 일어나는 양자상전이 현상 대부분은 상임계차원을 충분히 벗어난 지점에서 일어나며, 이를 위해 고안된 방법 중 하나로 수치재규격화군(NRG)이 있다. 기존의 RG 계산이 분배함수를 구하기 위한 적분 형태로 주어지는 반면, NRG 접근법은 시스템의 해밀토니안을 행렬로 표현하고 대각화하는 연산으로 이루어진다.

급격한 전산 기술의 발전에도 불구하고, 단번에 해밀토니안 대각화를 수행할 수 있는 고체 시스템의 크기는 (1차원 계의 경우) 최대 20–30 격자 공간 정도로 제한되어 있다. 전자 상호작용의 스케일 불변성을 확인하기에는 충분하지 않은 크기이다. 이런 수치적 제약 조건을 극복하고 극저온에서 일어나는 양자임계현상, 스케일 불변성 등을 전산 모사하기 위해, NRG는 대각화를 수행하기 전 해밀토니안 행렬에 몇 단계의 변환을 가한다.

이러한 변환은 행렬 표현의 기저(basis)를 최적화하는 단계로서, 시스템의 본질을 해치지 않는 한에서 행렬의 차원을 최저로 낮출 수 있도록 돕는다. 또한, 차단 에너지를 줄여가며 순차적으로 대각화하는 과정에서 고준위, 저준위 전자들 간의 상호작용이 정확하게 반영되도록, 행렬 원소 간의 계층을 조직하는 역할을 한다.

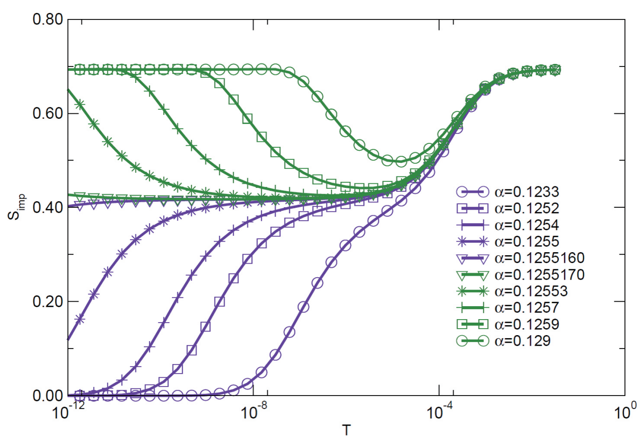
5. NRG를 통해 본 양자 임계 현상

(a)



(a) 강자성과 초전도 사이의 양자 상전이를 표현한 상태 도표. 수평축은 양자 상전이를 유도하는 압력의 세기를 나타내며, 수직축은 온도에 해당된다. 외부압력이 없을 때 강자성을 띠는 시스템이 임계 압력 이상($g>gc$)에서 초전도를 띠게 되는 상황을 그리고 있다. 파란 영역에 그려진 화살표들은 기저상태로부터 들뜬 준입자의 상태를 나타낸다. $g<g_c$ 영역의 수직 화살표는 한곳 스핀의 $S_z=\pm1/2$를 의미하고, $g>g_c$ 영역의 수평화살표는 $S_z=0$인 스핀을 의미한다. 수평화살표 중 하나의 방향이 역전된 것은 홑겹(singlet) 초전도 상태에 있던 전자가 세 겹(triplet) 보통(normal) 상태로 들뜨면서 준입자를 형성하는 것을 보여준다.

(b)



(b) Spin–boson 모델로 계산된 한곳 스핀(local spin)의 엔트로피. 수직축은 엔트로피, 수평축은 온도를 나타낸다. 서로 다른 곡선은 변수 α를 달리하여 계산된 값이다. 계산된 임계값은 $\alpha_c=0.1255165\pm0.0000005$로서, $\alpha>\alpha_c$이면 한곳 스핀의 $S_z=\pm1/2$로서 $\mathcal{S}_{imp}=\ln2$의 엔트로피를 갖고, $\alpha<\alpha_c$이면 $S=S_z=0$인 홑겹 상태로 $\mathcal{S}_{imp}=\ln1=0$ 의 엔트로피를 갖는다.

위의 그림 (a)는 강자성과 초전도 사이의 양자 상전이를 표현한 상태도표이다. Science 논문에서 발췌한 것으로 도식적 그림일 뿐 실제 계산 결과가 반영되어 있지는 않다. 그림 (b)는 NRG 계산 결과로서 스핀–보존 모델(spin–boson model) 상에서 계산된 한곳 스핀(local spin) 엔트로피의 온도 의존성을 보여준다. 두 그림은 모두 한곳 스핀(local spin)이 $S_z=\pm1/2$를 갖는 상태에서 $S_z=0$인 상태로 가는 양자 상전이를 보여준다. 그림 (a)의 경우 $S_z=\pm1/2$ 와 $S_z=0$은 각각 강자성($g<g_c$) 상태와 초전도($g>g_c$) 상태에 해당되며, 그림 (b)에서 $S_z=\pm1/2$ ($\alpha>\alpha_c$,)는 $\mathcal{S}_{imp(T=0)}=\ln2$를 향해, $S_z=0$ ($\alpha<\alpha_c$,)은 $\mathcal{S}_{imp(T=0)}=\ln1=0$으로 각각 엔트로피가 귀착되는 곡선에 해당된다.

그림 (b)에서 변수 α가 임계값 α_c에 가까이 갈수록 $\mathcal{S}_{imp(T)}$의 값이 온도에 무관하게 0.4 근처에서 머무르는 경향을 볼 수 있다. 이는 S_z의 값이 $\pm1/2$ 과 0 사이에서 스케일 불변한 형태로 요동하고 있다는 것을 의미한다. 이러한 양자요동(quantum fluctuation)이 나타나는 영역이 그림 (a)

에서 붉은색으로 표시된 양자임계영역(quantum critical regime), 즉 양자임계 고정점(quantum critical fixed point)에 해당된다. 시스템이 양자임계 고정점에 머무르는 최저 온도(T^*)는, 거듭제곱의 법칙 $T^*=A|\alpha-\alpha_c|^{z\nu}$에 따라 결정되며, 이 때 임계지수 $z\nu$는 시스템이 속한 보편성 부류(universality class)를 나타내는 지표가 된다. 비섭동(non-perturbative) 영역에 속한 시스템의 임계지수를 구할 수 있는 RG 이론은 흔치 않으며, NRG는 몇 안 되는 방법 중 가장 정교한 계산을 수행할 수 있는 기술로 알려졌다.

참고문헌

1. S. Sachdev, Quantum Phase Transitions, Cambridge University Press, Cambridge (1999)
2. K. G. Wilson, Rev. Mod. Phys. 47, 773 (1975)
3. R. Bulla et al., Rev. Mod. Phys. 80, 395 (2008)
4. S. Sachdev, Science, 288, 475 (2000)
5. R. Bulla et al., Phys. Rev. B 71, 045122 (2005)